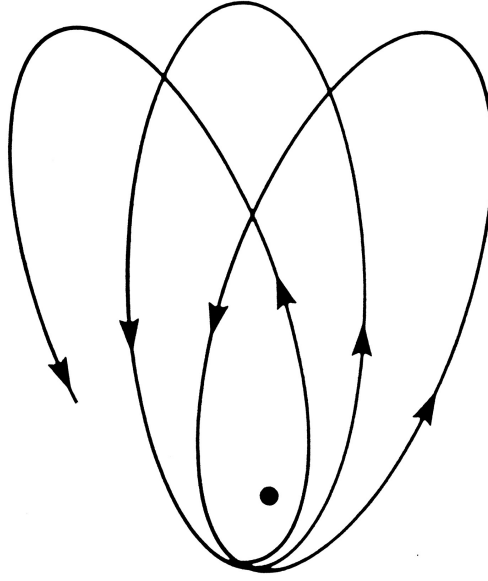


# Symétries cachées de l'atome d'Hydrogène

Aurélien Fabre et Étienne Dupont

15 décembre 2017



## Abstract

Nous étudions dans ce papier l'atome d'hydrogène par le biais du groupe de symétrie complet associé à ce système physique. La résolution analytique de l'équation de Schrödinger associé à l'atome d'hydrogène aboutit à la quantification de ses niveaux d'énergie, au calcul de la dégénérescence de ces niveaux d'énergie et à la détermination des fonctions d'onde solutions qui sont dérivées des harmoniques sphériques. La dégénérescence des niveaux d'énergie est le signe de l'existence de symétries du système. L'étude du système et particulièrement de la forme du potentiel coulombien, telle que menée par Pauli, fait intervenir l'invariance rotationnelle et la conservation du vecteur de Lenz-Pauli. L'équivalent de ces propriétés en termes d'observables dans l'espace hilbertien amène à considérer le groupe de symétrie  $SO(3) \times SO(3)$ . La suite du papier retrace ensuite l'extension proposée par Fock avec la considération d'une symétrie rotationnelle de dimension 4, avec le groupe  $SO(4)$ . Nous détaillons la projection stéréographique de l'espace associé à un problème de Kepler de dimension  $N$  sur l'hypersphère de dimension  $N + 1$ . Nous montrons ainsi plus généralement que pour un problème de Kepler à  $N$  dimensions, le groupe de symétrie complet est  $SO(N + 1)$ .

# 1 Introduction

L'atome d'hydrogène est un des rares systèmes quantiques donc la description exacte est possible. Contrairement aux autres entités du tableau périodique, le potentiel coulombien décrit exactement l'interaction entre l'électron et le noyau. L'atome d'hydrogène se résume à un système lié proton-électron qui possèdent chacun un spin  $1/2$ . Comme nous nous intéressons aux propriétés de symétrie orbitale de l'atome d'hydrogène, nous ne considérerons que l'hamiltonien associé, qu'on peut écrire:

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{k}{r}$$

avec  $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p},$

$$k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

La simplicité de la structure de l'atome d'hydrogène en a fait, dès les prémices de la mécanique quantique, un sujet d'étude très apprécié des physiciens pour valider et dépasser des concepts classiques et ainsi mieux comprendre, plus généralement, les atomes. Pourtant, l'hydrogène présente une singularité qui le distingue notablement des autres éléments du tableau périodique. Lorsqu'on s'intéresse aux niveaux d'énergie des atomes, on constate que chacun est identifiable de manière unique par deux nombres quantiques, sauf pour le cas de l'hydrogène où un seul nombre quantique suffit à distinguer les niveaux (voir fig. 1). Cette particularité a été établie bien avant sa description quantique grâce, notamment, à la formule empirique de Rydberg de 1888, se basant sur les raies d'émissions de l'atome.

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

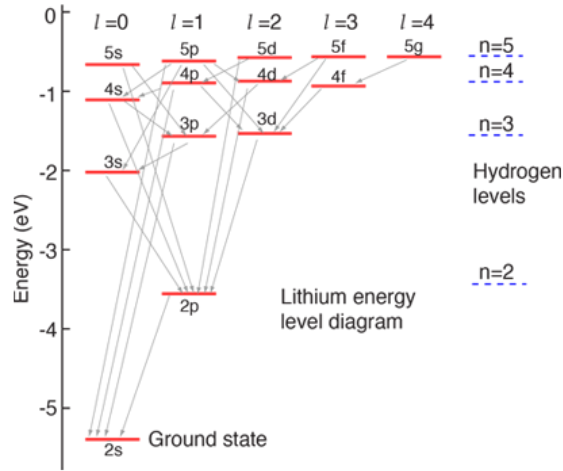


Figure 1: Comparaison des niveaux d'énergie des éléments Hydrogène et Lithium

Avec l'avènement de la mécanique quantique, l'obtention du spectre d'énergie de l'hydrogène a été l'une des premières préoccupation des physiciens. En 1926, deux articles publiés presque simultanément par Schrödinger[1] et Pauli[2] visent à décrire ce spectre d'énergie. Schrödinger détaille une approche simple et naturelle, en utilisant des coordonnées sphériques et en diagonalisant simultanément les opérateurs  $H$ ,  $L^2$  et  $L_z$ . Cette approche naturelle est aujourd'hui largement répandue dans les manuels de physique ; si elle permet effectivement d'obtenir les niveaux d'énergie de l'hydrogène, elle présente le désavantage de ne pas rendre compte de toutes les symétries inhérentes au système.

Les propriétés du problème de Coulomb, analogue au mouvement képlérien, entraînent la conservation du vecteur classique de Runge-Lenz  $\vec{m} = \vec{v} \times \vec{L} - k \frac{\vec{r}}{r}$  dont Pauli a établi un équivalent quantique, une observable  $\hat{M}$  qui commute avec  $H$ . En mettant en exergue cette nouvelle symétrie "cachée", Pauli a permis de prouver que le groupe de symétrie de l'atome d'hydrogène est isomorphe au groupe des transformations orthogonales de déterminant  $+1$ , de l'espace à 4 dimensions,  $SO(4)$ .

En 1935, Fock[3] propose une méthode alternative à l'analyse de Schrödinger et Pauli, basée sur l'étude de l'équation de Schrödinger dans l'espace des moments. Cette nouvelle méthode a permis à Al'lyluyev[4] de généraliser le problème de l'atome d'hydrogène à un problème de Kepler à  $N$  dimensions.

# Contents

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Approche de Schrödinger et symétrie "naïve"</b>	<b>5</b>
2.1	Résolution de l'équation de Schrödinger . . . . .	5
2.2	Étude des symétries mises en évidence . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Approche de Pauli</b>	<b>7</b>
3.1	Le vecteur de Lenz-Pauli . . . . .	7
3.2	Étude du groupe de symétrie complet . . . . .	7
<b>4</b>	<b>Approche de Fock</b>	<b>9</b>
4.1	L'espace des moments . . . . .	9
4.2	La projection stéréographique . . . . .	9
4.3	La résolution . . . . .	10
4.4	Action de $SO(N+1)$ . . . . .	11
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>11</b>

## 2 Approche de Schrödinger et symétrie "naïve"

### 2.1 Résolution de l'équation de Schrödinger

Commençons par décrire la méthode naturelle de résolution de l'équation de Schrödinger. Nous allons chercher à exhiber les valeurs possibles de l'énergie en nous plaçant dans un état propre de  $\hat{H}$  associé à l'énergie  $E$ . Nous ne considérerons que les états représentatifs de l'atome d'hydrogène, soit les états liés où  $E < 0$ .

L'équation aux valeurs propres  $\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$  pour le potentiel coulombien s'écrit:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{k}{r}\right)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (1)$$

$$\text{avec } \begin{cases} \Delta &= \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} & \text{le laplacien} \\ \vec{r} &= (x_1, x_2, x_3) & \text{le vecteur position} \\ r &= \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} & \text{la norme du vecteur } \vec{r} \\ \mu &= \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e & \text{la masse réduite} \\ k &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} & \text{dans le cas d'un hydrogénoïde} \end{cases}$$

$$\text{On note } \begin{cases} \hat{p}_i &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} & \text{les coordonnées de l'opérateur impulsion} \\ \hat{\vec{p}} &= (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3) & \text{l'opérateur impulsion} \\ \hat{\vec{L}} &= \vec{r} \times \hat{\vec{p}} & \text{l'opérateur moment cinétique orbital} \end{cases}$$

L'expression (1) appliquée à l'atome d'hydrogène ( $k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ ) en coordonnées sphériques donne:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} - \frac{k}{r}\right)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (2)$$

On montre facilement à partir de (2) que  $\hat{L}$  et  $\hat{H}$  commutent. Le jeu d'opérateurs  $(\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z)$  forme donc un ensemble d'observables qui commutent. Une étude préalable sur les propriétés de  $\hat{L}$  montre en outre que les harmoniques sphériques  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$  forment une base d'états propres de  $(\hat{L}^2, \hat{L}_z)$ . On peut donc procéder par séparation des variables en introduisant  $\psi_{l,m}(\vec{r})$  telle que:

$$\begin{aligned} \psi_{l,m}(\vec{r}) &= R_l(r)Y_{l,m}(\theta, \phi), \\ \hat{L}^2\psi_{l,m}(\vec{r}) &= l(l+1)\hbar^2\psi_{l,m}(\vec{r}), \\ \hat{L}_z\psi_{l,m}(\vec{r}) &= m\hbar\psi_{l,m}(\vec{r}), \end{aligned}$$

où  $l$  et  $m$  sont des entiers avec  $|m| < l$ . On obtient alors une nouvelle équation qui ne porte que sur  $R_l(r)$ :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{k}{r}\right)R_l(r) = ER_l(r) \quad (3)$$

Cette équation de Schrödinger peut être résolue analytiquement, on obtient alors pour chaque valeur de  $l$  un couple solution  $(R_{l,n'}(r), E_{n'})$  où  $n'$  est un entier naturel et où on considère, sans perte de généralité, que la suite  $(E_{n'})$  est croissante. L'étude de ces solutions montre qu'on a:

$$E_{n'} = -\frac{\frac{\mu k^2}{2\hbar^2}}{(n' + l + 1)^2}$$

En définissant  $n = n' + l + 1$  et  $E_I = \frac{\mu k^2}{2\hbar^2}$  on obtient la formule connue des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène:

$$E_{n'} = -\frac{E_I}{n^2}$$

Remarquons que l'égalité  $n = n' + l + 1$  permet d'affirmer que pour chaque valeur de  $n$ , le nombre quantique  $l$  peut prendre les valeurs  $0, 1, \dots, n-1$  et le nombre quantique  $m$  peut prendre les valeurs  $-l, -l+1, \dots, l$ . On peut alors décompter les états de même énergie:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (4)$$

On a donc obtenu les états propres de l'équation de Schrödinger ainsi que la dégénérescence des niveaux d'énergie associés.

## 2.2 Étude des symétries mises en évidence

L'expression (2) nous permet de vérifier facilement que l'opérateur d'inversion  $\hat{I}$  associé à l'opération géométrique  $I$  qui vérifie:

$$I : \begin{cases} \vec{r} \rightarrow -\vec{r} \\ \vec{p} \rightarrow -\vec{p} \end{cases}$$

est invariant par  $\hat{H}$ . Cet opérateur ne sera pas considéré dans la suite, comme il n'intervient pas dans la dégénérescence des niveaux d'énergie.

Nous avons remarqué dans la partie précédente l'égalité  $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$ . Cette relation de commutation nous assure que l'opérateur  $\hat{L}$  fait partie du groupe de symétries de  $\hat{H}$  et met en évidence l'invariance de  $\hat{H}$  par rotation ; remarquons que nous aurions pu directement déduire cette invariance de la forme de  $\hat{H}$ . Le groupe des rotations dans l'espace orbital est isomorphe au groupe  $SO(3)$ . Plaçons-nous dans un niveau d'énergie  $E_n$  de l'hydrogène. On sait que les opérateurs  $\hat{U}$  de  $SO(3)$  sont de la forme:

$$\hat{U}(\vec{u}, \alpha) = \exp(-i\alpha\vec{u}\hat{L}/\hbar),$$

Les relations sur les générateurs  $(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ , qui génèrent  $SO(3)$ , donnent que les représentations associées sont les représentations irréductibles de type  $D^{(l)}$ , de dimension  $2l+1$ . Introduisons désormais le *Principe de Wigner* appliqué à notre problème:

*Si le groupe de symétrie  $SO(3)$  coïncide avec le groupe de symétrie complet du système  $G$ , la représentation  $\{E_n, D^{(l)}\}$  est une représentation irréductible de  $G$ .*

En d'autres termes, chaque niveau d'énergie du système quantique est en correspondance avec l'une des représentations irréductibles du groupe de symétrie complet de son hamiltonien. Cette hypothèse purement physique repose sur l'idée que la structure du spectre d'énergie de l'hamiltonien est entièrement déterminée par son groupe de symétrie complet.

On sait ici que le niveau  $E_n$  possède une dégénérescence  $n^2$ . Si on se donne  $l < n$ , les harmoniques  $Y_{l,m}$  telles qu'on les a obtenues forment une base standard d'un espace  $D^{(l)}$ . On observe immédiatement que la dégénérescence  $2l+1$  issue de l'invariance géométrique est inférieure à la dégénérescence en énergie observée. A moins que le principe de Wigner ne soit mis en défaut par l'atome d'hydrogène, son application donne immédiatement le résultat suivant:

Le groupe de symétrie  $SO(3)$  ne coïncide pas avec le groupe de symétrie complet  $G$  de  $\hat{H}$

On remarque que l'on peut en fait attribuer à un niveau d'énergie une réunion d'espaces  $D^{(l)}$  avec  $l < n-1$ , permettant d'obtenir un espace propre  $\varepsilon_n$ , associé à  $E_n$ , complètement réductible:

$$\varepsilon_n = D^{(0)} \oplus D^{(1)} \oplus \dots \oplus D^{(n-1)}$$

La relation (4) permet de s'assurer que la dimension de  $\varepsilon_n$  correspond à la dégénérescence  $n^2$  en énergie. Nous allons vérifier dans les prochaines parties que le principe de Wigner se vérifie également ici, et par conséquent qu'il existe d'autres symétries inhérentes à l'atome d'hydrogène que la méthode de Schrödinger n'a pas permis d'établir.

### 3 Approche de Pauli

Maintenant que nous avons établi et étudié la symétrie par rotation de l'hamiltonien, nous allons découvrir une nouvelle symétrie "cachée" qui permet de rendre compte de l'apparente contradiction qui résultait de l'approche de Schrödinger.

#### 3.1 Le vecteur de Lenz-Pauli

L'étude des mouvements képlériens en mécanique classique met en évidence la constance d'un vecteur  $\vec{M}$  appelé le vecteur de Laplace-Runge-Lenz ou encore de Lenz-Pauli qui prend la forme suivante dans le cas de l'atome d'hydrogène:

$$\vec{m} = \frac{\vec{p} \times \vec{l}}{\mu} - \frac{k\vec{r}}{r}$$

Le vecteur  $\vec{m}$  est perpendiculaire au moment cinétique orbital  $\vec{l}$  et est dirigé le long du grand axe de la trajectoire elliptique. Dans une étude classique de l'atome d'hydrogène, on observe donc la conservation d'au moins 6 paramètres que sont les trois composantes de  $\vec{l}$  ainsi que les trois composantes de  $\vec{m}$ .

Nous allons établir un équivalent quantique  $\hat{M}$  du vecteur  $\vec{m}$ . On remarque facilement que substituer simplement les opérateurs aux vecteurs dans l'expression précédente donne un opérateur non hermitien. Un opérateur naturel et hermitien en correspondance avec  $\vec{m}$  est:

$$\hat{M} = \frac{\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{p}}}{\mu} - \frac{k\hat{\vec{r}}}{r}$$

On peut vérifier que  $\hat{M}$  commute avec  $\hat{H}$ . En d'autres termes, la quantité  $\langle \hat{M} \rangle$  est une constante du mouvement, ce qui correspond au cas classique.

#### 3.2 Étude du groupe de symétrie complet

Pour identifier le groupe de symétrie associé à  $\hat{M}$ , on étudie les relations de commutation des composantes de cet opérateur, qui définissent l'algèbre de Lie du groupe recherché :

$$[\hat{M}_i, \hat{M}_j] = \frac{-2i\hbar}{\mu} \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{H} \hat{L}_k$$

où  $\epsilon_{ijk}$  est le tenseur complètement antisymétrique vis-à-vis des permutations des trois indices.

Les relations de commutation font apparaître les composantes de l'opérateur moment cinétique orbital. Nous allons définir de nouveaux opérateurs de symétrie pour "découpler" le problème. En rappelant que l'on s'intéresse aux états physiques de l'hydrogène, donc d'énergie  $E < 0$ , on peut considérer :

$$\hat{M}' = \left( -\frac{\mu}{2\hat{H}} \right)^{1/2} \hat{M} \quad (5)$$

où  $-\hat{H}^{-1/2}$  se comporte de la manière suivante:  $-\hat{H}^{-1/2} |\psi\rangle = (-E)^{-1/2} |\psi\rangle$ . Définissons maintenant les générateurs  $\hat{I}$  et  $\hat{K}$ :

$$\begin{aligned} \hat{I} &= \frac{1}{2}(\hat{\vec{L}} + \hat{M}') \\ \hat{K} &= \frac{1}{2}(\hat{\vec{L}} - \hat{M}') \end{aligned} \quad (6)$$

Ces deux opérateurs commutent naturellement avec  $\hat{H}$  et vérifient:

$$\begin{aligned} [\hat{I}_i, \hat{I}_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{I}_k \\ [\hat{K}_i, \hat{K}_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{K}_k \\ [\hat{I}_i, \hat{K}_j] &= 0 \end{aligned}$$

On reconnaît immédiatement en les  $\hat{I}_i$  et  $\hat{K}_j$  deux algèbres de Lie de  $SO(3)$ . La troisième relation nous assure que le groupe de symétrie total exhibé est un produit  $SO(3) \cdot SO(3)$  qui est homomorphe à  $SO(3) \times SO(3)$ . Les représentations irréductibles  $SO(3) \times SO(3)$  peuvent s'écrire  $D^{(I)} \otimes D^{(K)}$

où  $\hbar^2 I(I+1)$  et  $\hbar^2 K(K+1)$  sont valeurs propres de  $\hat{I}^2$  et  $\hat{K}^2$  ;  $I$  et  $K$  peuvent être demi entiers ou entiers, comme les deux opérateurs correspondant ne sont pas des moment cinétiques orbitaux. En outre, en remarquant que  $\hat{M} \cdot \hat{L} = 0$  on a aussi  $\hat{I}^2 = \hat{K}^2$  ce qui nous assure que  $I = K$  pour tous les états liés de l'atome d'hydrogène.

Plaçons-nous sur l'espace associé à la représentation  $D^{(I)} \otimes D^{(I)}$ , de dimension  $(2I+1)^2$ . Comme  $\hat{H}$  commute avec  $\hat{I}$  et  $\hat{K}$ , on sait que cet espace est stable par  $\hat{H}$ . On a de plus:

$$\hat{M}^2 = k^2 + \frac{2\hat{H}(\hat{L}^2 + \hbar^2)}{\mu}$$

Soit en remplaçant  $\hat{M}$  par l'expression (5)

$$\hat{H} \left[ \hat{M}'^2 + \hat{L}^2 + \hbar^2 \right] = \frac{\mu k^2}{2}$$

En substituant  $\hat{M}'$  et  $\hat{L}$  avec  $\hat{I}$  et  $\hat{K}$  grâce à l'expression (6), et comme  $\hat{I}^2 = \hat{K}^2 = \hbar^2 I(I+1)$  on obtient :

$$\hat{H} = E = -\frac{\frac{\mu k^2}{2\hbar^2}}{(2I+1)^2}$$

En identifiant  $2I+1$  à  $n$ , on retrouve exactement le résultat obtenu dans la première partie:

$$E = -\frac{E_I}{n^2}$$

qui correspond effectivement à la dégénérescence  $(2I+1)^2 = n^2$ . Ce résultat nous permet d'affirmer, en vertu du principe de Wigner, que le groupe de symétrie homomorphe à  $SO(3) \times SO(3)$  que nous avons déterminé est bien le groupe de symétrie complet de l'atome d'hydrogène.

De plus, on peut faire le lien avec les résultats de la première partie en voyant que  $SO(3)$  est un sous-groupe du groupe d'invariance de l'hydrogène. La représentation  $D^{(I)} \times D^I$  est irréductible vis-à-vis du groupe de symétrie complet mais réductible vis-à-vis de  $SO(3)$ . La décomposition en représentations irréductibles des produits tensoriels des  $D^J$  donne:

$$D^{(I)} \times D^{(I)} = D^{(0)} \oplus D^{(1)} \oplus \dots \oplus D^{(2I)}$$

En rappelant la relation  $2I+1 = n$  on s'assure qu'on a bien retrouvé la relation énoncée dans la dernière partie.

Dans l'approche de Pauli, nous avons construit le groupe complet d'invariance de l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène. Cependant, l'approche présente deux lacunes:

- Nous n'avons pas identifié de groupe connu isomorphe à ce groupe de symétrie. Nous allons voir par la suite que le groupe  $SO(4)$  est isomorphe au groupe d'invariances de l'atome d'hydrogène
- L'approche ne peut malheureusement pas se généraliser à d'autres cas physique que les problèmes de Kepler en dimension 3. Nous allons montrer qu'on peut en fait étendre les résultats sans trop d'efforts à un problème de Kepler en dimension  $N$ .



## 4 Approche de Fock

### 4.1 L'espace des moments

L'approche de Pauli utilise le principe de correspondance et étudie les propriétés de l'observable hermitienne associée au vecteur de Lenz-Pauli qui est essentiellement un opérateur différentiel d'ordre 2 en les coordonnées spatiales : cette propriété nous invite à travailler dans l'espace des moments où l'on s'attend donc à obtenir des opérateurs différentiels d'ordre 1. La transformée de Fourier de l'équation de Schrödinger, ce qui revient à considérer l'équation de Schrödinger dans l'espace des moments, s'écrit ainsi :

$$\left(-\frac{p^2}{2\mu} - E\right) \Phi(\vec{p}) = \frac{k}{2\pi^2\hbar} \int \frac{1}{|\vec{q} - \vec{p}|^2} \Phi(\vec{q}) d^3q \quad (7)$$

où  $\Phi(\vec{p}) = TF[\Psi](\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi(\vec{x}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} d^3x$ .

Cette équation peut être généralisée à un espace à  $N$  dimensions, ce qui correspond au problème de Kepler en dimension supérieure. Nous proposons de développer l'approche de Fock dans cet espace plus général. En dimension  $N$ , l'équation devient alors :

$$\left(-\frac{p^2}{2\mu} - E\right) \Phi(p) = \frac{k}{\pi\omega_{N-1}\hbar} \int \frac{1}{|\vec{q} - \vec{p}|^{N-1}} \Phi(q) d^Nq \quad (8)$$

où  $\omega_n = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}$  la surface de l'hypersphère  $S_n$  en dimension  $n$ . Comme dans l'approche de Pauli, nous ne considérons que le cas des états liés avec  $E < 0$  et nous posons  $p_0^2 = -2\mu E$ . L'équation prend alors la forme :

$$-\frac{1}{2\mu} (p^2 + p_0^2) \Phi(p) = \frac{k\Gamma((N-1)/2)}{\pi^{(N+1)/2}} \int \frac{1}{|\vec{q} - \vec{p}|^{N-1}} \Phi(q) d^Nq \quad (9)$$

### 4.2 La projection stéréographique

A partir de cette équation, nous cherchons à exhiber une symétrie en dimension supérieure. Pour cela, on se propose de passer de l'espace à  $N$  dimensions à l'hypersphère  $S_N$  de l'espace à  $N+1$  dimensions. Pour cela, une solution classique est d'introduire la projection stéréographique de  $S_N$ , c'est-à-dire l'application  $\phi : \mathbb{R}^N \rightarrow S_N$  définie par :

$$\phi : \vec{x} \mapsto \frac{2}{|\vec{x}|^2 + 1} \vec{x} + \frac{|\vec{x}|^2 - 1}{|\vec{x}|^2 + 1} \vec{n}$$

où on considère  $\mathbb{R}^N$  comme un hyperplan de  $\mathbb{R}^{N+1}$  et où on prend  $\vec{n}$  un vecteur unitaire de  $\mathbb{R}^{N+1}$  normal à l'hyperplan  $\mathbb{R}^N$ . Cette projection s'interprète de la manière suivante :  $\vec{u}$  est le point de  $S_N$  qui intersecte la droite définie par les points  $\vec{n}$  et  $\vec{x}$ . On associe ainsi à chaque plan de l'hyperplan un unique point de  $S_N$  ; on remarque immédiatement que cette application est bijective. Ce point est essentiel et permet dans la suite d'effectuer un changement de variable dans l'équation de Schrödinger.

A présent, dans l'espace des moments, on considère la projection stéréographique normalisée  $u : \mathbb{R}^N \rightarrow S_N$  telle que :

$$u : \vec{p} \mapsto \vec{u} = \phi\left(\frac{\vec{p}}{p_0}\right) = \frac{2p_0}{p^2 + p_0^2} \vec{x} + \frac{p^2 - p_0^2}{p^2 + p_0^2} \vec{n}$$

A cette transformation de l'espace des moments, on associe la transformation suivante de l'espace des fonctions d'onde  $\xi$  telle que :

$$(\xi\Phi)(\vec{u}) = \frac{1}{p_0^{1/2}} \left(\frac{p_0^2 + p^2}{2p_0}\right)^{(N+1)/2} \Phi(\vec{p})$$

On obtient aussi la transformation de la mesure associée à la transformation de l'espace :

$$d^{N+1}\Omega_{S_N} = 2\delta(u^2 - 1)d^{N+1}u = \left(\frac{2p_0}{p_0^2 + p^2}\right)^N d^Np$$

On démontre alors que l'équation de Schrödinger dans l'espace des moments pour la fonction d'onde transformée  $\xi\Phi$  devient :

$$(\xi\Phi)(\vec{u}) = \frac{\mu k}{2p_0\hbar} \frac{\Gamma((N-1)/2)}{\pi^{(N+1)/2}} \int \frac{1}{|\vec{v} - \vec{u}|^{N-1}} (\xi\Phi)(\vec{v}) d^{N+1}\Omega_{S_N} \quad (10)$$

et que la fonction d'onde transformée  $\xi\Phi$  vérifie :

$$\int |(\xi\Phi)(\vec{u})|^2 d^{N+1}\Omega_{S_N} = \int |\Phi(\vec{p})|^2 d^N p$$

le choix de la transformation des fonctions d'onde assurant ainsi la normalisation.

### 4.3 La résolution

Ensuite, dans l'espace à  $N + 1$  dimensions, le noyau  $\frac{1}{|\vec{u} - \vec{v}|^{N-1}}$  est essentiellement la fonction de Green de l'opérateur de Laplace, c'est-à-dire :

$$\Delta_u^{N+1} \frac{1}{|\vec{u} - \vec{v}|^{N-1}} = -(N-1)\omega_{N+1}\delta^{N+1}(\vec{u} - \vec{v}) \quad (11)$$

La proximité de l'équation du noyau  $\frac{1}{|\vec{u} - \vec{v}|^{N-1}}$  avec une équation de Poisson  $\Delta f = g$  avec  $g = \delta$  la distribution Dirac invite à considérer une solution proche de la fonction de Green de l'opérateur laplacien. L'étude des fonctions de  $L^2(S_N)$  satisfaisant l'équation de Schrödinger  $\nabla_{S_N}^2 f = \alpha f$  pour une certaine valeur propre  $\alpha$  et pour l'opérateur de Laplace-Beltrami  $\nabla_{S_N}^2$  (laplacien sur l'hypersphère) permet d'obtenir les résultats suivants :

1.  $\alpha = -\lambda(\lambda + N - 1)$  pour  $\lambda$  entier naturel
2. Pour le même espace propre, il y a  $N_\lambda = \binom{\lambda+N}{\lambda} - \binom{\lambda+N-2}{\lambda-2}$  vecteurs propres linéairement indépendants (c'est-à-dire le nombre d'harmoniques sphériques indépendantes associées au même  $\lambda$ ). L'indice  $q$  permet de classifier l'ensemble de ces  $N_\lambda$  solutions
3.  $f$  est appelée harmonique sphérique sur  $S_N$  et est notée  $Y_{\lambda,q}^{(n)}$  avec  $\lambda$  qui quantifie les valeurs possibles pour la valeur propre  $\alpha$  et  $q$  qui indexe une base de l'espace propre associé à  $\lambda$

Cela nous incite à proposer une solution de la forme :

$$\mathcal{Y}_{\lambda,q}(\vec{u}) = |\vec{u}|^\lambda Y_{\lambda,q} \left( \frac{\vec{u}}{|\vec{u}|} \right)$$

avec  $Y_{\lambda,q}$  les harmoniques sphériques qui forment un ensemble complet des solutions de l'équation au laplacien sur l'hypersphère. Cette solution est un polynôme homogène de degré  $\lambda$  en  $\vec{u}$  qui vérifie la condition :

$$\Delta^{N+1} \mathcal{Y}_{\lambda,q}(\vec{u}) = 0$$

Des développements que nous ne détaillons pas ici permettent d'aboutir à l'équation suivante vérifiée par  $\mathcal{Y}_{\lambda,q}(\vec{u})$  :

$$\mathcal{Y}_{\lambda,q}(\vec{u}) = \frac{(N-1+2\lambda)\Gamma((N-1)/2)}{4\pi^{(N+1)/2}} \int \frac{1}{|\vec{v} - \vec{u}|^{N-1}} \mathcal{Y}_{\lambda,q}(\vec{v}) d^{N+1}\Omega_{S_N} \quad (12)$$

On reconnaît la forme de l'équation de Schrödinger pour  $\xi\Phi$ .  $\mathcal{Y}_{\lambda,q}(\vec{u})$  telle que définie plus haut est donc solution de l'équation de Schrödinger transformée. Le caractère complet des harmoniques sphériques dans la résolution de l'équation au laplacien sur l'hypersphère permet d'identifier les  $\mathcal{Y}_{\lambda,q}(\vec{u})$  aux solutions recherchées, et la comparaison des équations d'écrire :

$$\frac{\mu k}{2p_0\hbar} = \frac{(N-1+2\lambda)\Gamma((N-1)/2)}{4\pi^{(N+1)/2}}$$

d'où en termes de niveaux d'énergie :

$$E = -\frac{p_0^2}{2\mu} = -\frac{\frac{\mu k^2}{2\hbar^2}}{(N-1+2\lambda)^2}$$

En dimension 3, on peut alors identifier  $\lambda$  avec  $2I$  ( $I$  défini à la partie précédente). L'indépendance des niveaux d'énergie par rapport au paramètre  $q$  permet d'écrire que chaque niveau d'énergie  $E$  associée à  $\lambda$  est dégénéré  $N_\lambda$  fois, où  $N_\lambda = \binom{\lambda+N}{\lambda} - \binom{\lambda+N-2}{\lambda-2}$  (le nombre de paramètres d'un polynôme homogène arbitraire de  $N+1$  variables de degré  $\lambda$  moins le nombre de conditions homogènes données par la condition sur  $\mathcal{Y}_{\lambda,q}(\vec{u})$ ), soit  $(\lambda+1)^2$  en dimension 3. On retrouve ainsi les dégénérescences déjà identifiées dans les parties précédentes.

#### 4.4 Action de $SO(N+1)$

Voyons à présent comment le groupe de symétrie  $SO(N+1)$  agit sur les fonctions propres, définies ci-dessus à partir des harmoniques sphériques. Pour  $M$  une matrice de rotation de l'espace à  $N+1$  dimensions, avec  $\mathcal{D}$  une représentation du groupe orthogonal  $SO(N+1)$  de dimension  $N$ , les harmoniques sphériques se transforment selon :

$$Y_{\lambda,q}(M\vec{u}) = \sum_{q'} \mathcal{D}^{(\lambda)}(M)_{q,q'} Y_{\lambda,q'}(\vec{u})$$

On obtient ainsi immédiatement l'action sur  $\mathcal{Y}_{\lambda,q}(\vec{u})$  en écrivant la transformation des coordonnées de  $\vec{u}$   $((M\vec{u})_i = \sum_j M_{ij}u_j)$  et en considérant la transformation correspondante du polynôme symétrique  $\mathcal{Y}_{\lambda,q}(\vec{u})$ . Cette représentation de  $SO(N+1)$  sur l'espace des fonctions propres est celle constituée d'une unique ligne de  $\lambda$  boîtes dans le formalisme des tableaux d'Young, c'est-à-dire un tenseur à  $\lambda$  indices covariants, symétrique en ses indices et de trace nulle en chaque paire d'indices.

En particulier dans le cas de la dimension 3, les représentations de  $SO(4)$  se notent  $\mathcal{D}^{I,I}$  avec  $\lambda = 2I$  pour une description en termes de deux moments angulaires. On peut alors montrer que ces représentations s'écrivent comme une somme directe de représentations de  $SO(3)$  pour  $l$  allant de 0 à  $2I$ . On retrouve alors les résultats précédents en introduisant le nombre quantique principal  $n = \lambda + 1 = 2I + 1$ .

## 5 Conclusion

La simplicité apparente de l'atome d'hydrogène en a fait l'objet de nombreuses études et un outil de test des théories de la physique. Le problème de Kepler, c'est-à-dire celui d'un potentiel sphérique en  $1/r$  dans un système à deux corps, a ainsi bénéficié d'un traitement large dans les publications scientifiques. Ces études ont mis à jour l'implication de phénomènes plus profonds qu'attendus pour ce système simple.

L'existence de dégénérescence des niveaux d'énergie, marque de l'existence de symétries, a poussé les recherches en direction d'une symétrie additionnelle aux symétries de l'espace. Le travail de Pauli a exhibé l'existence d'une symétrie par le biais du vecteur de Lenz-Pauli, déjà connu dans la mécanique céleste et l'étude des trajectoires des astres.

Les avancées et développements de Fock et des physiciens qui l'ont suivi ont permis d'identifier le groupe de symétrie complet de l'atome d'hydrogène à  $SO(4)$ . Plus généralement, pour un problème de Kepler à  $N$  dimensions, le groupe de symétrie complet peut s'identifier à  $SO(N+1)$ . La démarche de Fock justifie ce passage à une dimension supérieure avec une projection stéréographique. Des publications plus récentes montrent que l'approche peut être menée par un calcul purement algébrique sur des opérateurs hermitiens dans l'espace à  $N$  dimensions sans nécessiter l'utilisation d'une projection stéréographique.

L'étude de l'algèbre de Lie du groupe  $SO(4)$ , groupe de symétrie complet du système, et de ses représentations, identiques à celles de  $SU(2) \times SU(2)$  permet ainsi de comprendre fondamentalement ce système.

## References

- [1] E. Schrödinger, "The non relativistic equation of the de Broglie waves," Ann. Physik **79**, 361-376 (1926)
- [2] W. Pauli "On the hydrogen spectrum from the standpoint of the new quantum mechanics," Z. Physik **36**, 336-363 (1926)
- [3] V. A. Fock "On the theory of the hydrogen atom," Z. Physik **98**, 145 (1935)
- [4] S. P. Alliluyev, JETP **33**, 200 (1957), Soviet Phys. JETP **6**, 156 (1958)
- [5] M. Erdogdu, M. Özdemir, "Generating Four Dimensional Rotation Matrices" (2015)
- [6] S. J. Weinberg, "The SO(4) Symmetry of the Hydrogen Atom" (2011)
- [7] M. Bander, C. Itzykson, "Group Theory and the Hydrogen Atom(I)," Reviews of modern Physics, **38**, 330-345 (1966)
- [8] G. Valent, "The hydrogen atom in electric and magnetic fields : Pauli's 1926 article" (2002)
- [9] J.-P. Blaizot, J.-C. Tolédano, "Symétries & physique microscopique", Ellipses (1997)
- [10] G. Györgyi, J. Révai, "Hidden symmetry of the Kepler problem," JETP, **48**, 1445-1447 (1965)